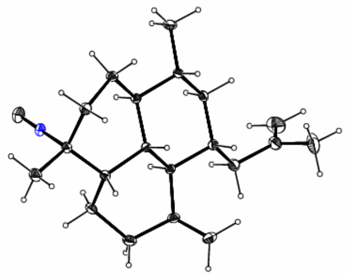
UNIVERSITA' DEGLI STUDI DI SALERNO

FACOLTA' DI FARMACIA

Mondo microscopico

Mondo macroscopico



C. A. Mattia

Sviluppi storici

Fraunhofer	1814	spettri atomici
Prout	1815	pesi atomici
Newland	1815	legge delle ottave
Ångstrom	1868	righe spettro in 10^{-8} cm
Mendeleyev	1869	legge periodica
Meyer	1870	volumi atomici
Hertz	1879	raggi catodici

Sviluppi storici

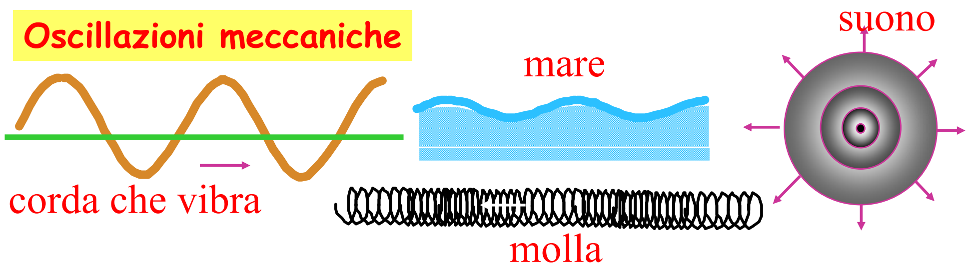
Balmer	1885	righe idrogeno
Röntgen	1895	raggi X
Thomson	1898	carica/massa elettrone
Rutherford	1898	α; β; γ; $t_{½}$
Plank	1900	corpo nero
Einstein	1906	effetto fotoelettrico; C_v
Thomson	1908	modello atomico
Rutherfor	1911	modello atomico
Bohr	1913	modello atomico

Sviluppi storici

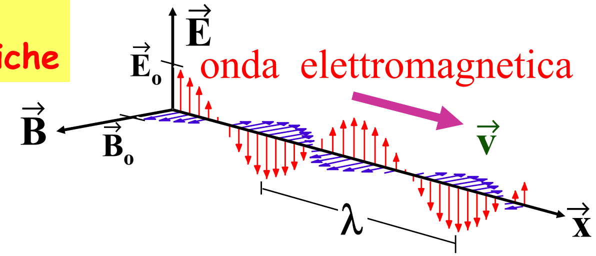
Moseley	1913	numero atomico
De Broglie	1923	$\lambda = h/p$
Davisson-Germer	1923	diffrazione elettronica
Thomson-Reid	1923	diffrazione elettronica
Compton	1925	particelle fotoniche
Heisemberg	1926	quantomeccanica
Schrödinger	1926	quantomeccanica

Fenomeni ondulatori

Oscillazioni meccaniche



Oscillazioni elettromagnetiche



Periodo e frequenza

Fenomeno periodico: f(t) = f(t+T)
ritorna alla stessa configurazione dopo uno stesso intervallo di tempo.

Periodo T = minimo intervallo di tempo dopo il quale il fenomeno ritorna alla stessa configurazione = durata di una oscillazione (unita' di misura: secondo).

$$f(t) = A\ \mathrm{sen}(2\pi\, t/T) = A\ \mathrm{sen}[(2\pi/T)\, t] = A\ \mathrm{sen}(\omega t)$$

pulsazione $\omega = 2\pi/T = 2\pi\nu$

Se 1 oscillazione dura n secondi, in 1 secondo ci sono 1/n oscillazioni

frequenza = n.oscillazioni/sec

$\nu = 1/T$

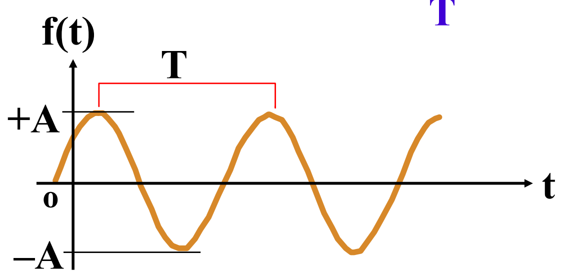
Hz=1/s

Ampiezza e energia di un'onda

$$f(t) = A\ \mathrm{sen}(\omega t - \phi)$$

$$\omega = \frac{2\pi}{T} = 2\pi\,\nu$$

- A = ampiezza
- T = periodo
- ν = frequenza
- ϕ = fase



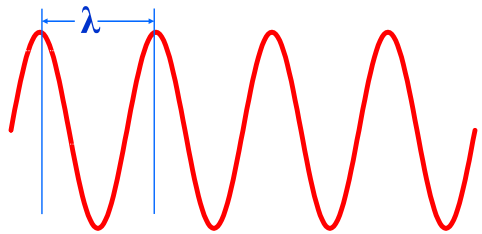
ENERGIA DI UN'ONDA

$E \propto A^2$

Un'onda si propaga anche nello spazio ovvero f = f(x,t)

La radiazione elettromagnetica

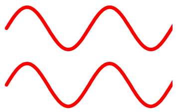
La luce è un'onda elettromagnetica, a cui è associata anche una **lunghezza d'onda λ** (distanza fra due picchi consecutivi) = **velocità/frequenza.**



La luce trasporta un'**energia** che aumenta al diminuire della sua lunghezza d'onda

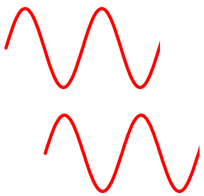
La radiazione elettromagnetica

La luce può essere considerata come un insieme di corpuscoli, detti **fotoni**, ciascuno dei quali porta un "pacchetto d'onda"



Onde in fase

Due pacchetti d'onda sono ***in fase*** se le posizioni dei loro picchi e delle loro valli coincide. Altrimenti essi sono ***fuori fase***.



Onde fuori fase

Equazione d'onda

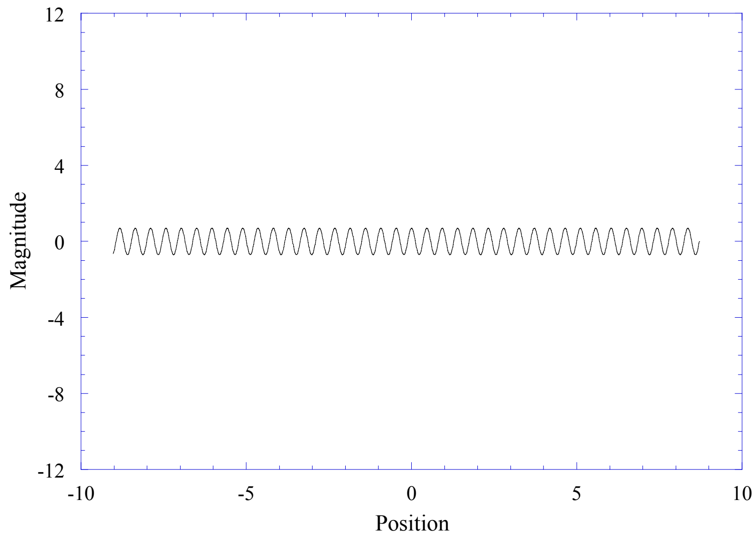
$$A = A_0 \text{ sen } [2\pi(x/\lambda - t/T) - \varphi]$$

$$A = A_0 \text{ sen } [2\pi(\bar{\nu}x - \nu t) - \varphi]$$

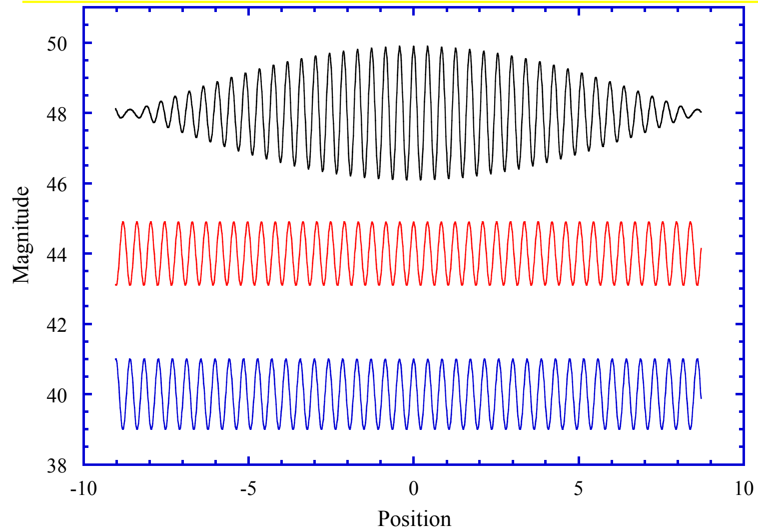
A	ampiezza
A_0	ampiezza massima
$\bar{\nu}$	numero d'onda
φ	fase
ω	frequenza angolare ($2\pi\nu$)

$$\nu = c/\lambda$$

Pacchetto d'onda



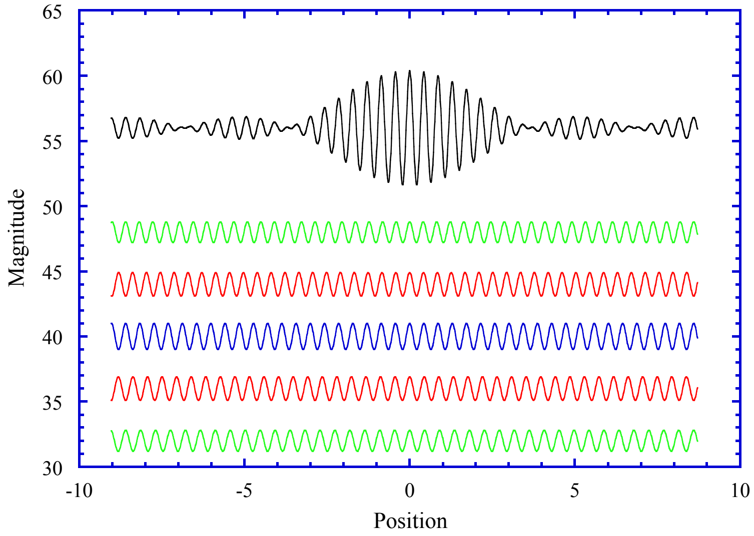
2 onde



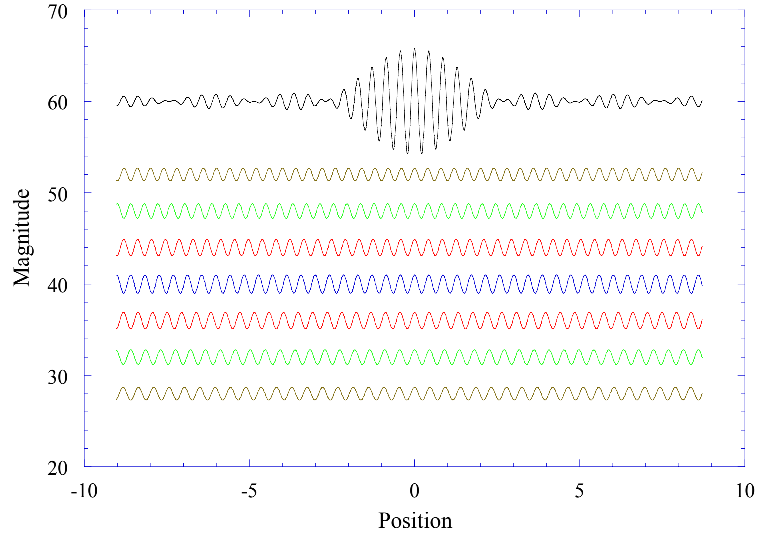
$$E = A (\cos \omega_1 t + \cos \omega_2 t)$$

$a = (\omega_1+\omega_2)/2$; $b = (\omega_1-\omega_2)/2$; $E = 2A\cos(at)\cos(bt)$

5 onde



7 onde



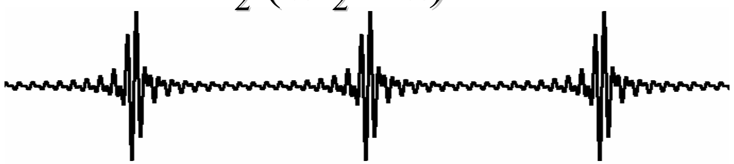
Battimenti

n onde stessa ampiezza A e pulsazione $\omega_{1;\ldots.}$

$\omega_n - \omega_1 = \Delta\omega$ $\qquad$ $\omega_{i+1} - \omega_i = \Delta\omega/(n-1) = w$

$t=0 \Rightarrow E=nA$ $\qquad$ $t=t_1\ (wt_1=2\pi/n) \Rightarrow E=0$

$t=t_2\ (wt_2=2\pi) \Rightarrow E=nA$



E non è trascurabile negli intervalli $mt_2 \pm t_1$

$n \rightarrow \infty \Rightarrow t_2 \rightarrow \infty$

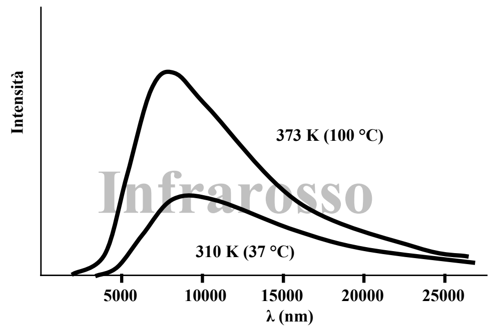
Un treno d'onda di durata Δt è dato dalla sovrapposizioine di un numero elevatissimo (∞) di onde con frequenza compresa tra ν_{min} e ν_{max} ($\Delta\nu$) tale che $\Delta\nu \bullet \Delta t \simeq 1$

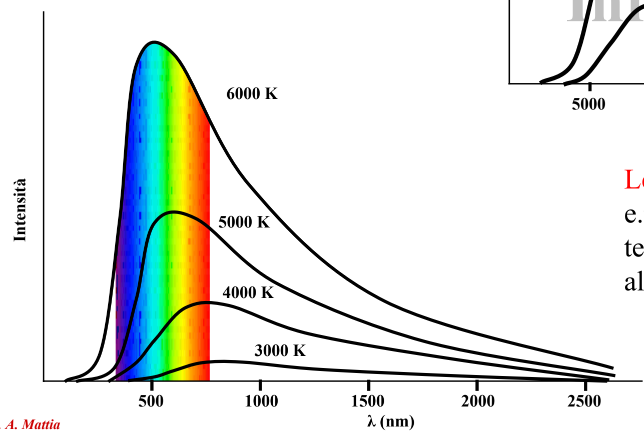
$(n-1)w/2\pi \bullet 2\pi/nw \simeq 1$

Corpo nero

A temperatura ambiente, l'irraggiamento termico si concentra nella regione infrarossa dello spettro elettromagnetico.

Aumentando la temperatura, l'energia emessa si distribuisce su lunghezze d'onda minori.



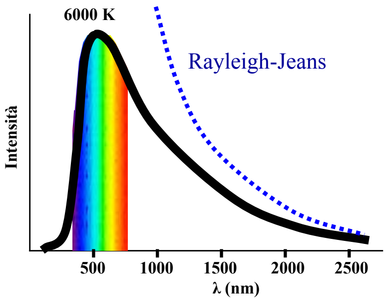


Legge di Wien L'energia e.m. emessa da un corpo a temperatura T è massima alla lunghezza d'onda:

$$\lambda_m = \frac{2.898 mm \cdot K}{T}$$

Corpo nero

Secondo la meccanica classica lo spettro di corpo nero dovrebbe rispettare la legge di Rayleigh-Jeans: ma secondo questa legge l'intensità emessa dovrebbe essere infinita (catastrofe ultravioletta)



Planck risolve il problema ipotizzando che all'interno del corpo nero l'energia viene scambiata non in modo continuo, ma in quantità discrete, detti **quanti**.

$$S(\lambda)=2\pi ckT/\lambda^4$$

$$S(\lambda)=2\pi c^2h/\lambda^5(e^{hc/\lambda kT}-1)$$

Scambio di energia in modo continuo

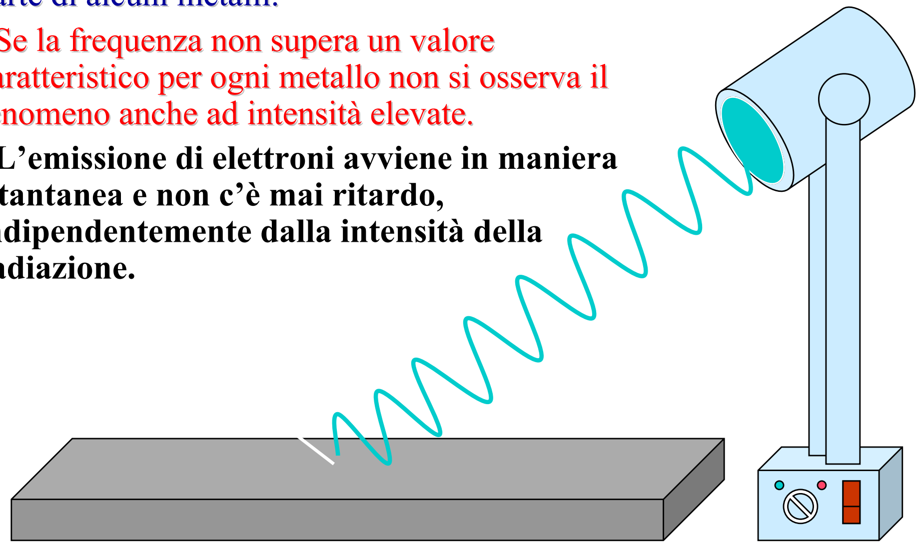
Scambio di energia per quanti

Effetto fotoelettrico

La luce può causare l'emissione di elettroni da parte di alcuni metalli.

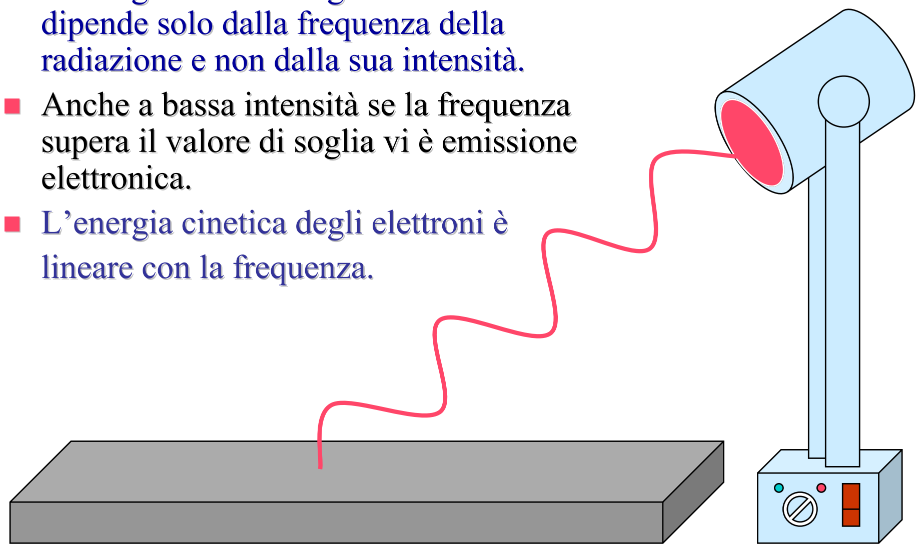
Se la frequenza non supera un valore caratteristico per ogni metallo non si osserva il fenomeno anche ad intensità elevate.

L'emissione di elettroni avviene in maniera istantanea e non c'è mai ritardo, indipendentemente dalla intensità della radiazione.



Effetto fotoelettrico

- L'energia cinetica degli elettroni uscenti dipende solo dalla frequenza della radiazione e non dalla sua intensità.
- Anche a bassa intensità se la frequenza supera il valore di soglia vi è emissione elettronica.
- L'energia cinetica degli elettroni è lineare con la frequenza.



Effetto fotoelettrico

Nel 1905 Einstein per spiegare il fenomeno portò alle estreme conseguenze l'idea di quantizzazione di Planck: la radiazione è costituita da quanti di energia, in seguito chiamati fotoni.

Ritorno ad una descrizione corpuscolare della radiazione (Newton).

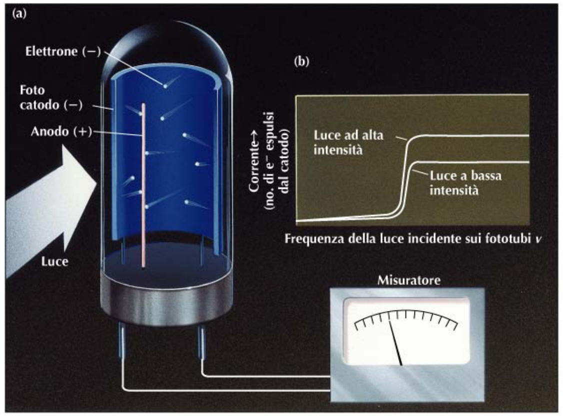
Comparsa del dualismo onda-particella.

Un elettrone assorbe un fotone di energia hν e quando tale energia è superiore al lavoro di estrazione dal metallo W, viene espulso da questo.

Effetto fotoelettrico

Il fotone deve avere l'energia necessaria per estrarre l'elettrone.

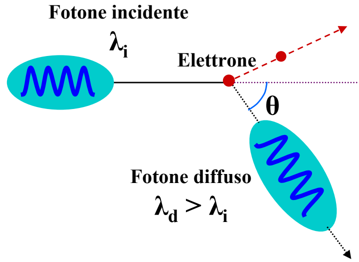
$$E = h\nu$$



L'intensità della luce influenza solo la corrente, cioè il flusso d'elettroni (ovvero il numero di elettroni espulsi).

Effetto Compton

Nella collisione della luce con un elettrone in quiete, la luce diffusa cambia la sua lunghezza d'onda (e la nuova λ dipende dall'angolo di scattering).



$$\delta\lambda = (h/m_e c)(1-\cos\theta)$$

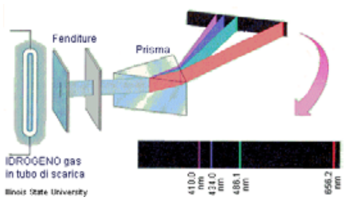
$(h/m_e c) = \lambda$ Compton elettrone

m_e = massa elettrone

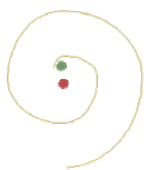
c = velocità luce

Non esiste spiegazione classica.

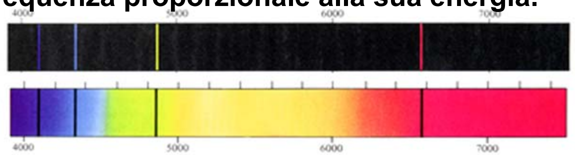
Atomo di idrogeno

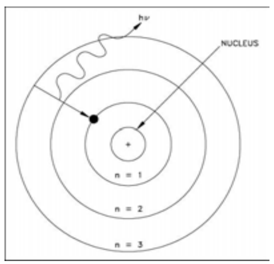


Secondo la fisica classica l'atomo dovrebbe essere instabile perché l'elettrone ruotando attorno al nucleo dovrebbe perdere energia e collassare sul nucleo.



Per spiegare le righe nello spettro dell'atono di idrogeno, Bohr ipotizza che l'elettrone possa stare solo su orbite fisse, sulle quali non irradia. Quando passa da una traiettoria all'altra irradia un fotone con frequenza proporzionale alla sua energia.





Il modello spiega lo spettro dell'atono di idrogeno ma introduce ipotesi fisiche che non hanno un fondamento teorico solido.

Corda vibrante

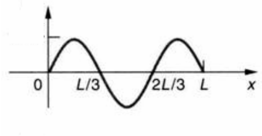
$$f_n(x,t) = A_n \text{sen}(2\pi x/\lambda+\delta)\text{sen}(2\pi\nu_n t+\varphi)$$

$x = 0 \Rightarrow f = 0;\ \delta=0$

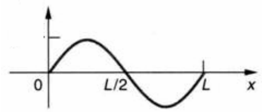
$x = L \Rightarrow f = 0;\ 2\pi L/\lambda = n\pi$

$\nu_n = n\nu_0 \quad \lambda = 2L/n$

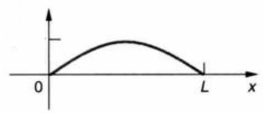
$n = 3 \quad \nu_3 = 3\nu_0 \quad \lambda = 2L/3$



$n = 2 \quad \nu_2 = 2\nu_0 \quad \lambda = L$



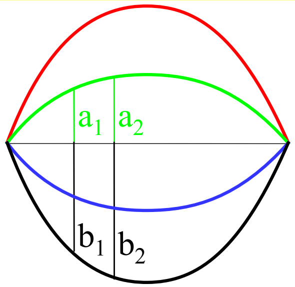
$n = 1 \quad \nu_1 = \nu_0 \quad \lambda = 2L$



Corda vibrante

stato stazionario

$$\frac{a_i}{a_k} = \frac{b_i}{b_k}$$



$$F(x,t) = f(x)g(t)$$

$$F(x,t) = \Sigma c_i f_i(x,t)$$

La funzione che descrive una generica vibrazione è una combinazione lineare di tutti i modi normali.

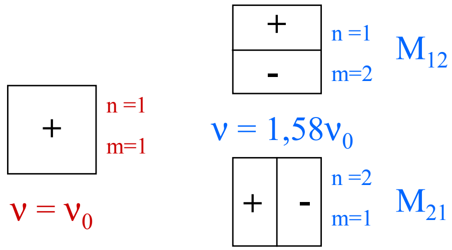
Membrane quadrate

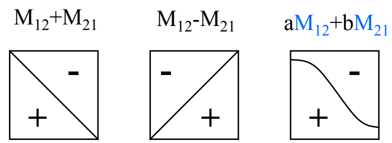
Estendendo l'analisi a sistemi a più dimensioni, per esempio una membrana tesa su un telaio quadrato di lato L, si nota che la quantizzazione può dipendere da più numeri quantici.

$$\nu_n = \nu_0[(n^2+m^2)/2]^{½} \qquad \lambda = 2L/[(n^2+m^2)/2]^{½}$$

Alcuni modi normali hanno la stessa frequenza e si parla di degenerazione.

Degenerazione ⇒ scelta arbitraria "modi normali".





Una combinazione lineare di modi normali degeneri è un modo normale.

Operatori

- **Un operatore è qualcosa che, eseguendo un'operazione, modifica una funzione in un'altra.**
- **Equazione ad autovalore: operatore(funzione)=k•funzione**

  esempio derivata(e^{5x})=5•e^{5x}

  operatore ≡ derivata rispetto a x **autovalore ≡ 5**
- **Operatore posizione (q): q•**
- **Operatore quantità di moto (p): ħ/i•∂/∂q**
- **Operatore energia potenziale: V•**
- **Operatore energia cinetica (K=p²/2m): 1/2m(ħ/i•∂/∂q(ħ/i•∂/∂q))**

$$K = -\hbar^2/2m \bullet \partial^2/\partial q^2$$

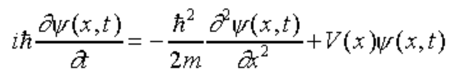
Meccanica quantistica

Per spiegare lo spettro del corpo nero, l'atomo di idrogeno e l'effetto fotoelettrico è stato necessario introdurre **ipotesi** che superano la meccanica classica.

Queste ipotesi non si inseriscono però in un formalismo ben definito e coerente, sono intuizioni applicabili ad ambiti ristretti.

Nel 1926 viene sviluppata la **meccanica quantistica** che fornisce un quadro coerente per spiegare i fenomeni prima citati.

Erwin Schrödinger introduce un'equazione capace di spiegare lo spettro dell'atomo di idrogeno e in generale il comportamento di una particella in un potenziale.



$$i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x,t)$$

Introduce la **funzione d'onda**

Werner Heisemberg, contemporaneamente, sviluppa un formalismo diverso basato sull'algebra delle matrici, che si dimostra equivalente all'approccio di Schrödinger.

Introduce il **principio di indeterminazione**

Meccanica classica

In meccanica classica un sistema è descritto dalle **equazioni del moto**, ad es.

$$F = ma$$

La soluzione delle equazioni del moto ci fornisce la **posizione** e la **velocità** di ogni particella ad ogni istante, ovvero la traiettoria.

Meccanica quantistica

In **meccanica quantistica** dobbiamo risolvere **l'equazione di Schrödinger.**

E' un'equazione differenziale: si calcola la **funzione d'onda** **Ψ(x,t)**, che contiene tutte le informazioni sul sistema.

Perché i corpi macroscopici non mostrano proprietà ondulatorie?

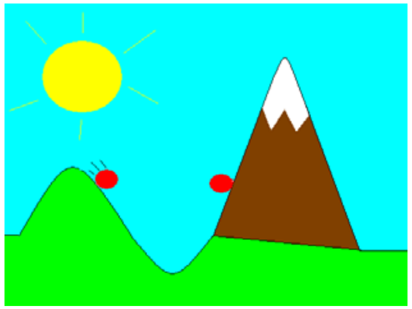
Ma che significato ha **Ψ(x,t)**???

Significato probabilistico

In meccanica quantistica non possiamo conoscere la traiettoria di una particella, possiamo solo conoscere la **probabilità $|\Psi(x,t)|^2$** che si trovi in un certo punto o in un certo stato.

Perché esse appaiono quando facciamo esperimenti su scale della lunghezza d'onda dell'oggetto considerato, ma siccome h (costante di Planck) è piccola, per una palla da Bowling si manifesterebbero su distanze dell'ordine di 10^{-34} m.

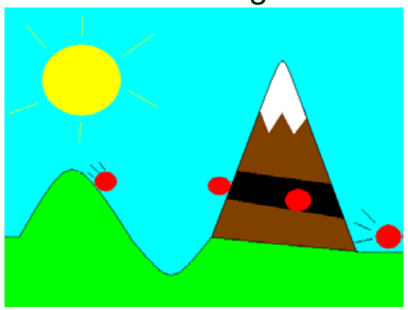
Effetto tunnel



Secondo la meccanica classica la pallina, partendo ferma dalla vetta della collina, non riuscirà mai a superare la vetta della montagna

Secondo la quantomeccanica invece esiste una **probabilità non nulla** che la pallina superi la montagna

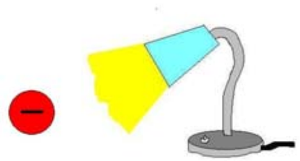
Non sappiamo a priori se **una** pallina passa o no, possiamo solo sapere la probabilità di attraversare la barriera.



Se abbiamo tante palline possiamo prevedere la frazione di quelle che passano e di quelle che non passano, ma non il comportamento di una!

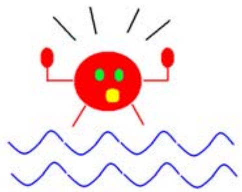
Meccanica quantistica

La fisica si occupa esclusivamente di ciò che può essere osservato.



Per osservare qualcosa dobbiamo farlo interagire con uno strumento di misura.

Questa interazione perturba l'oggetto (ad es. un elettrone) osservato.



Esiste un limite intrinseco all'accuratezza delle osservazioni che possiamo compiere.

Il principio di indeterminazione

Il processo di misura perturba irreparabilmente ciò che stiamo misurando.

E' possibile conoscere con precisione arbitraria la posizione di una particella.

E' possibile conoscere con precisione arbitraria la sua velocità.

Non è possibile conoscere entrambe queste variabili con precisione qualsiasi.

$$m\Delta v \cdot \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}$$

Meccanica quantistica relativistica

Meccanica quantistica

- complementarietà dei comportamenti ondulatorio e corpuscolare.
- natura probabilistica.
- Principio di indeterminazione.

Relatività ristretta

- $E=mc^2$

- relatività della simultaneità.
- contrazione delle lunghezze, dilatazione dei tempi.

Antimateria

Descrive il comportamento di particelle relativistiche

Equazione di Dirac

L'elettrone ha un momento angolare intrinseco: **spin** (esperimento di Stern-Gerlach, 1922)

Antimateria: le **antiparticelle** hanno numeri quantici opposti rispetto alle particelle (positrone, 1932)

Il numero delle particelle non rimane costante: annichilazione, creazione di coppie

Equazione di Schrödinger

Permette di trovare l'**autofunzione Ψ** e l'**autovalore E** per un sistema che interagisce con un potenziale **V**.

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} + V(x)\Psi(x) = E\Psi(x)}$$

$$\mathrm{H}\,\Psi = \mathrm{E}\,\Psi$$

Particella in una scatola

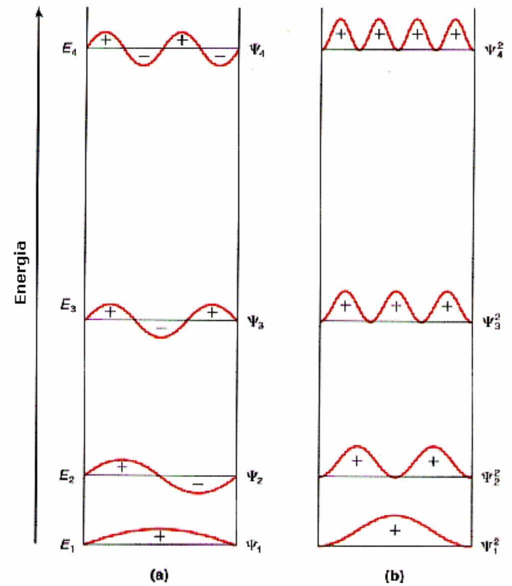
- **Particella di massa m, confinata in una scatola monodimensionale di lunghezza L.**
- **Il potenziale sarà nullo all'interno della scatola e ∞ all'esterno.**
- **L'equazione HΨ = EΨ ha la seguente soluzione:**

$$\Psi_n = (2/L)^{1/2}\text{sen}(n\pi x/L)$$

$$E_n = n^2h^2/8mL^2 \qquad\qquad n = 1,2,3,\ldots$$

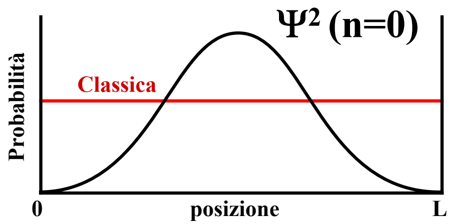
- **L'energia minima non è 0 ma $h^2/8mL^2$ (energia di punto zero), come richiesto dal principio di indeterminazione.**

Particella in una scatola

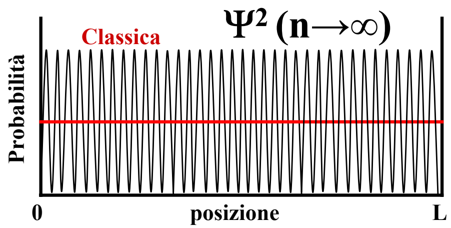


Diagrammi per i primi quattro livelli della funzione (a) e del suo quadrato (b).

Particella in una scatola



La probabilità di osservare la particella è massima al centro della scatola e bassa alle due estremità.



Per energie elevate la probabilità di osservare la particella è praticamente uniforme come per la meccanica classica.

Principio di corrispondenza

Particella in una scatola

$$\Psi_n = (2/L)^{1/2}\text{sen}(n\pi x/L)$$

$$E_n = n^2h^2/8mL^2 \qquad\qquad n = 1,2,3,\ldots$$

L'intervallo tra i livelli energetici contigui è:

$$\Delta E = E_{n+1} - E_n = (2n+1)h^2/8mL^2$$

che diminuisce all'aumentare della massa della particella e della grandezza della scatola.

$\Delta E_{2\text{-}1}$ elettrone in scatola di 1Å è $1{,}8 \cdot 10^{-17}$ J.

$\Delta E_{2\text{-}1}$ molecola N_2 in scatola di 10 cm è $3{,}5 \cdot 10^{-40}$ J.

$\Delta E_{2\text{-}1}$ palla biliardo in scatola di 1 m è $8{,}2 \cdot 10^{-67}$ J.

n per le tre particelle (velocità di 1 m/s): 1, 10^7, 10^{32}

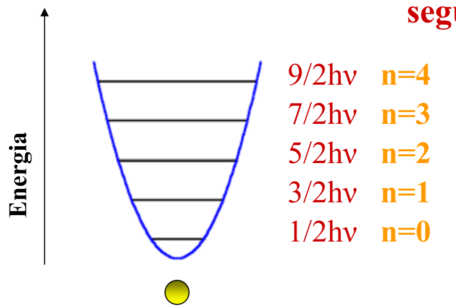
Oscillatore armonico

Particella di massa m soggetta a forza di richiamo proporzionale allo spostamento.

$\mathbf{F = -kx}$ e quindi potenziale $\mathbf{V(x) = ½kx^2}$

$F = ma$ $\qquad a = \partial^2 x/\partial t^2$ $\qquad \nu = \frac{1}{2\pi}\,(k/m)^{1/2}$

L'equazione di Schrödinger fornisce la seguente relazione per l'energia:



$$\varepsilon_n = (n+½)h\nu$$

con n = 0,1,2,3,…

Anche in questo caso è presente l'energia di punto zero $\varepsilon_0 = ½h\nu$.

Rotatore rigido

- Particella di massa **m** in moto su una superfice sferica di raggio **R,** ovvero con momento d'inerzia $I = mR^2$.
- **Le funzioni d'onda accettabili (armoniche sferiche) dell'equazione di Schrödinger sono relative a due numeri quantici J e m_J.**
- **J = 0, 1, 2, 3,…**
- $\mathbf{m_J = 0, \pm1, \pm2, \pm3, \ldots, \pm J}$
- L'energia dipende solo da J secondo la relazione:

$$E_J = J(J+1)h^2/8\pi^2 I$$